用户测评报告

知识与逻辑增强物质科学科研助手系统（含技术动态跟踪与分析系统）

报告编号：ZNKXJ-2025-05WZKXZS-001

测评对象：知识与逻辑增强物质科学科研助手系统

测评周期：2025.12.08 -- 2025.12.16

测评方：中国科学技术大学化学物理系合成氨催化研究团队

一、测评概述

1. 测评目的：本次用户测评以收集用户对知识与逻辑增强物质科学科研助手系统的实际使用反馈为主要目的，重点评估系统在物质科学相关研究与学习场景中的综合适用性与专业一致性。通过分析用户在使用 AI 科学问答、AI Protocol 生成、信息抽取及技术动态跟踪等功能过程中的主观评价，考察系统在专业准确性、信息组织能力及交互体验方面的表现，识别当前功能体系中的优势与不足，为后续功能优化提供参考依据。

2. 测评范围：本次测评范围围绕系统的核心功能模块展开，重点关注用户在科学问题咨询、实验方案生成、论文信息抽取以及技术动态跟踪等典型使用环节中的实际体验反馈。测评内容主要涵盖用户对系统输出结果在专业合理性、内容完整性及操作便捷性等方面的评价，不涉及系统底层算法与模型实现，仅基于用户可感知功能进行分析。

3. 测评方法：本次测评采用用户反馈收集的方式开展，组织具有物质科学相关背景的用户在实际科研或学习任务中使用智能助手各项功能，并在完成相关操作后通过问卷与文字描述形式反馈其使用体验与意见。测评结论基于用户主观评价与建议的汇总分析形成，用于综合反映系统在真实应用场景下的使用效果。

二、测评信息

1. 测评对象版本：知识与逻辑增强物质科学科研助手系统 V3.0。

2. 目标用户：中国科学技术大学化学物理系合成氨催化研究团队研究生。

3. 测评样本：4 名用户，4 组测试数据（含 AI 科学问答，AI Protocol 生成，信息抽取，和技术动态跟踪功能）。

三、测评结果

3.1 测评数据

用户在使用过程中主要涉及四类典型应用场景，包括：AI 科学问答、AI Protocol 生成、信息抽取以及技术动态跟踪，具体示例如下：

AI 科学问答

1. 用户上传文献 Low-Temperature Ammonia Synthesis on Iron Catalyst with an Electron Donor，并向搜索框中输入“完成抽取功能，以催化剂为主体，抽取催化剂的属性如：催化剂名称、活性相、载体、助剂、反应压力、反应温度、空速、催化剂活性、稳定性，整理成表格形式”；
2. 用户上传文献 Activity Enhancement of Ceria-Supported Co-Mo Bimetallic Catalysts by Tuning Reducibility and Metal Enrichment，并向搜索框中输入“理解这篇文献，写个综述”。

AI Protocol 生成

1. 用户上传文献 Activity Enhancement of Ceria-Supported Co-Mo Bimetallic Catalysts by Tuning Reducibility and Metal Enrichment，并点击“Protocol 生成”按钮。

信息抽取

1. 用户上传文献 Efficient Non-dissociative Activation of Dinitrogen to Ammonia over Lithium-Promoted Ruthenium Nanoparticles at Low Pressure，并点击“信息抽取”按钮。

技术动态跟踪

1. 用户从时间维度对催化剂性能演化进行动态分析，并可基于多维因变量指标（包括反应压力、反应温度、催化活性及催化稳定性）开展趋势性观察。

3.2 测评结果

根据用户在 AI 科学问答模块提供的需求，知识与逻辑增强物质科学科研助手系统生成的内容如下：

KCL 首页 AI科学问答 AI Protocol生成 信息抽取 技术动态跟踪

完成抽取功能，以催化剂为主体，抽取催化剂的属性如：催化剂名称，活性相、载体、助剂、反应压力、反应温度、空速、催化剂活性、稳定性；整理成表格形式；

催化剂名称	活性相	载体	助剂	反应压力	反应温度	空速 (WHSV)	催化剂活性（出口 NH_3 浓度 / STY）
BaH_2-BaO/Fe/CaH_2	金属铁颗粒（20–40 nm，平均26 nm）	CaH_2（微米级颗粒）	BaH_2、BaO	0.9 MPa	100–300 °C	36,000 mL g^{-1} h^{-1}	出口 NH_3 浓度：0.007%（100 °C）STY: 0.02 kg NH_3 kg^{-1} cat^{-1} h^{-1}；200 °C时为0.050%（0.12），300 °C时为0.353%（0.86）[p.7890]
Commercial promoted-Fe	金属铁（非晶态或纳米晶）	K_2O、Al_2O_3、CaO、MgO（混合氧化物载体）	K_2O、Al_2O_3、CaO、MgO	0.9 MPa	300 °C（无法在200 °C以下催化）	36,000 mL g^{-1} h^{-1}	出口 NH_3 浓度：0.383%（300 °C）STY: 0.93 kg NH_3 kg^{-1} cat^{-1} h^{-1}；但300 °C时活性显著降，200 °C以下无生成 [p.7890]
Ru/BaH_2-BaO	Ru纳米颗粒（2–7 nm，平均4 nm）	BaH_2-BaO（沉积于CaH_2大颗粒上）	BaH_2、BaO	0.9 MPa	>300 °C（100 °C无活性）	36,000 mL g^{-1} h^{-1}	100 °C无氨生成；300 °C以上活性较高，但低于200 °C活性低于BaH_2-BaO/Fe/CaH_2 [p.7890]
Fe/BaH_2-BaO	Fe纳米	BaH_2-	0.9	300 °C	36,000	300 °C时无氨生成

PDF ✓
Low-Temperature Am...

Protocol生成

×

KCL 首页 AI科学问答 AI Protocol生成 信息抽取 技术动态跟踪

Activity enhancement of ceria-supported Co-Mo bimetallic catalysts by tuning redu...
1.6 MB

理解这篇文献，写个综述

该研究聚焦于可还原氧化物支撑的双金属催化剂在氨合成中的设计与性能调控，以二氧化铈（CeO_2）为载体，构建钴-钼（Co-Mo）双金属体系，通过调控钼的添加方式（同步添加或分步添加），系统探究其对催化剂结构、还原行为、表面化学状态及催化活性的影响。研究表明，分步添加钴与钼显著提升催化剂的氨合成活性，其活性较同步添加样品高出2.5倍以上，这一性能差异源于金属分散度、还原程度和金属-载体相互作用的优化[p.1]。

研究发现，当钴与钼同时添加时，钼氧化物易发生团聚形成结晶态MoO_3，阻碍钴氧化物的还原，抑制金属钴的生成，从而降低氢吸附与迁移能力；而采用先加钴后加钼的分步策略，则有效避免了钼氧化物对钴还原的抑制，促进金属钴、低价态钼物种以及三价铈（Ce^{3+}）的生成[p.3]。XPS和深度剖析结果表明，分步添加的催化剂具有更高的表面钴暴露量、更丰富的低价钼（Mo^{4+}, Mo^{5+}）及金属钴比例，且这些活性组分在近表面区域富集，有利于反应物吸附与活化[p.4]。

进一步的氢气/氮气程序升温脱附（H_2-TPD/N_2-TPD）实验显示，分步添加的催化剂表现出更强的氢气与氮气吸附能力，且氢物种更倾向于通过直接形成H_2的方式脱附，而非生成水，这有助于缓解氢中毒效应，提升反应动力学[p.6]。D/H交换与温度程序表面反应（TPSR）结果也证实，该催化剂中氢物种具有更高的动态活性与快速脱附能力，有利于氨合成路径的进行[p.7]。

此外，原位Raman光谱和电子结构分析揭示，钴的引入增强了载体氧空位浓度，提升了铈的还原性；而钼的存在则通过电子转移影响氧物种的结合能，形成协同效应。这种"表面富集—强还原—高效氢传递"的结构特征共同促进了氨合成反应的进行[p.5]。

PDF ✓
Activity enhancement ...

×

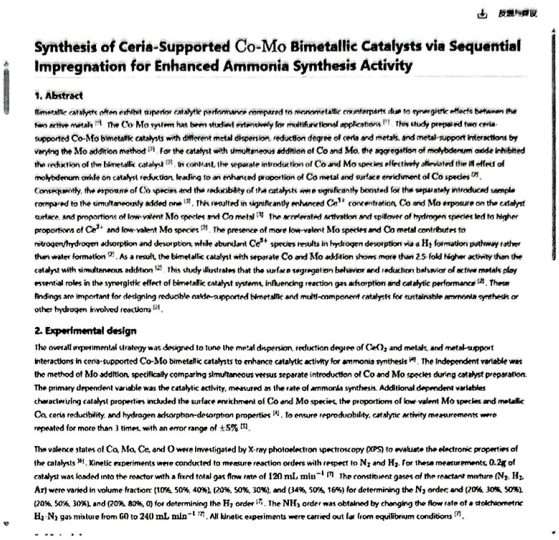
目 大模型 ^

根据用户在 AI Protocol 生成模块提供的需求，知识与逻辑增强物质科学科研助手系统生成的内容如下：



Journal of Catalysis

Activity enhancement of ceria-supported Co-Mo bimetallic catalysts by tuning reducibility and metal enrichment



Synthesis of Ceria-Supported Co-Mo Bimetallic Catalysts via Sequential Impregnation for Enhanced Ammonia Synthesis Activity

1. Abstract

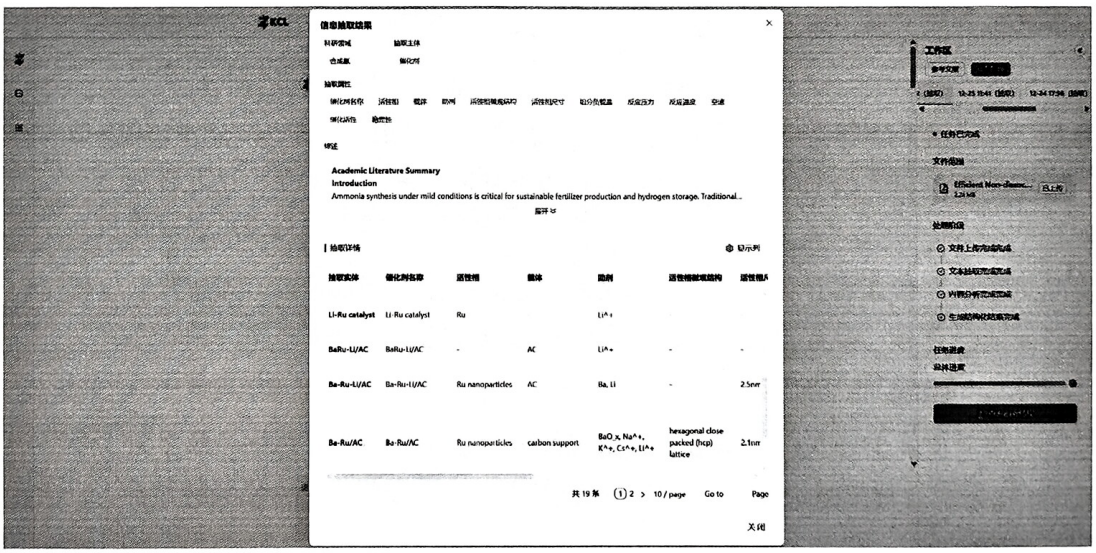
Bimetallic catalysts often exhibit superior catalytic performance compared to monometallic counterparts due to synergistic effects between the two active metals [1]. The Co-Mo system has been studied extensively for multifunctional applications [1]. This study prepared two ceria-supported Co-Mo bimetallic catalysts with different metal dispersion, reduction degree of ceria and metals, and metal-support interactions by varying the Mo addition method [1]. For the catalyst with simultaneous addition of Co and Mo, the aggregation of molybdenum oxide inhibited the reduction of the bimetallic catalyst [1]. In contrast, the separate introduction of Co and Mo species effectively alleviated the ill effect of molybdenum oxide on catalyst reduction, leading to an enhanced proportion of Co metal and surface enrichment of Co species [1]. Consequently, the exposure of Co species and the reducibility of the catalysts were significantly boosted for the separately introduced sample compared to the simultaneously added one [1]. This resulted in significantly enhanced Ce^{3+} concentration, Co and Mo exposure on the catalyst surface, and proportions of low-valent Mo species and Co metal [1]. The accelerated activation and spillover of hydrogen species led to higher proportions of Ce^{3+} and low-valent Mo species [1]. The presence of more low-valent Mo species and Co metal contributes to nitrogen/hydrogen adsorption and desorption, while abundant Ce^{3+} species results in hydrogen desorption via a H_2 formation pathway rather than water formation [2]. As a result, the bimetallic catalyst with separate Co and Mo addition shows more than 2.5-fold higher activity than the catalyst with simultaneous addition [2]. This study illustrates that the surface segregation behavior and reduction behavior of active metals play essential roles in the synergistic effect of bimetallic catalyst systems, influencing reaction gas adsorption and catalytic performance [2]. These findings are important for designing reducible oxide-supported bimetallic and multi-component catalysts for sustainable ammonia synthesis or other hydrogen involved reactions [2].

2. Experimental design

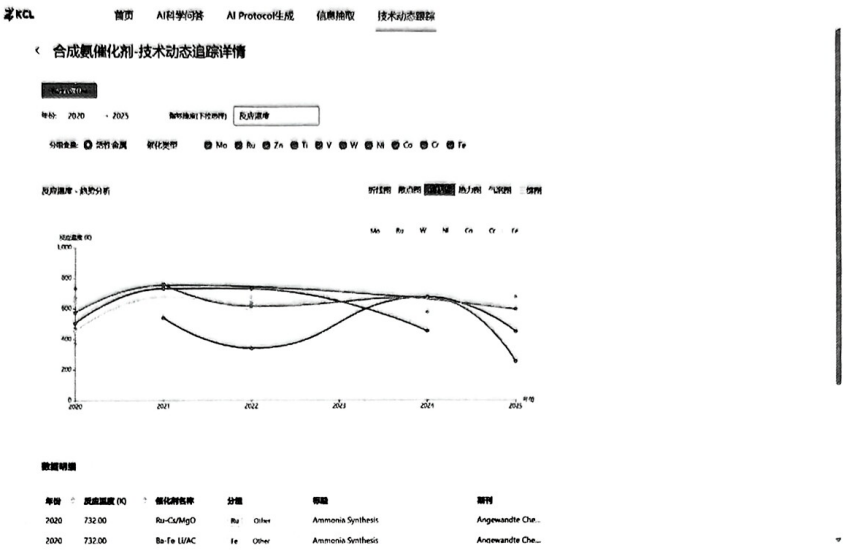
The overall experimental strategy was designed to tune the metal dispersion, reduction degree of CeO_2 and metals, and metal-support interactions in ceria-supported Co-Mo bimetallic catalysts to enhance catalytic activity for ammonia synthesis [4]. The independent variable was the method of Mo addition, specifically comparing simultaneous versus separate introduction of Co and Mo species during catalyst preparation. The primary dependent variable was the catalytic activity, measured as the rate of ammonia synthesis. Additional dependent variables characterizing catalyst properties included the surface enrichment of Co and Mo species, the proportions of low valent Mo species and metallic Co, ceria reducibility, and hydrogen adsorption-desorption properties [4]. To ensure reproducibility, catalytic activity measurements were repeated for more than 3 times, with an error range of ±5% [3].

The valence states of Co, Mo, Ce, and O were investigated by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) to evaluate the electronic properties of the catalysts [4]. Kinetic experiments were conducted to measure reaction orders with respect to N_2 and H_2. For these measurements, 0.2g of catalyst was loaded into the reactor with a fixed total gas flow rate of 120 mL min^{-1} [1]. The constituent gases of the reactant mixture (N_2, H_2, Ar) were varied in volume fraction: (10%, 50%, 40%), (20%, 50%, 30%), and (34%, 50%, 16%) for determining the N_2 order; and (20%, 30%, 50%), (20%, 50%, 30%), and (20%, 80%, 0) for determining the H_2 order [7]. The NH_3 order was obtained by changing the flow rate of a stoichiometric H_2-N_2 gas mixture from 60 to 240 mL min^{-1} [7]. All kinetic experiments were carried out far from equilibrium conditions [9].

根据用户在信息抽取模块提供的需求，知识与逻辑增强物质科学科研助手系统生成的内容如下：



根据用户在技术动态跟踪模块提供的需求，知识与逻辑增强物质科学科研助手系统生成的内容如下：



3.3 用户反馈

1. 优势亮点：

1) AI 科学问答：该模块能够辅助科研初期用户在单篇文献中快速定位与自身研究相关的关键信息，有效降低文献阅读与信息筛选成本，在文献理解与要点提取方面具有较高实用性；

2) AI Protocol 生成：该模块功能完整度较高，对论文中实验相关信息的抽取准确性较好，能够快速聚焦文献中的实验设计与实验条件，为实验方案理解与复现提供支持；

3) 信息抽取：该模块在无需通读全文的情况下即可系统性提取论文中涉及的样品信息，并明确给出对应出处，提升了样品信息整理效率，具有较明显的人力节省优势；

4) 技术动态跟踪：该模块能够按时间维度对特定领域的关键技术指标进行汇总与可视化展示，有助于用户快速把握技术发展趋势并归纳阶段性规律。

2. 主要问题：

1) AI 科学问答：部分用户认为，当前问答能力主要依赖单篇文献分析，在回答开放性或综合性问题时仍有提升空间，后续需结合更大规模的文献知识库，并在输出结果中提供明确的文献来源与依据，同时在文献存储阶段加强主题分类管理；

2) AI Protocol 生成：测评过程中暂未发现影响核心功能使用的明显问题；

3) 信息抽取：部分用户认为，当前抽取结果中部分样品信息字段不完整，建议对抽取结果进行筛选，优先保留论文中重点讨论的主要样品，以提升结果的可用性与专业性；

4) 技术动态跟踪：测评过程中暂未发现影响核心功能使用的明显问题。

3. 典型建议：

1) AI 科学问答：建议后续由单篇文献辅助阅读工具逐步升级为基于领域知识库的综合问答系统，并在条件允许的情况下引入图像理解与图像生成能力，以增强对实验图表与示意图的支持；

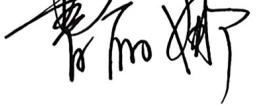
2) AI Protocol 生成：建议在支持自定义语言风格的基础上，进一步结合大规模文献数据，拓展自动生成文献综述或书籍章节等高层次内容生成能力；

3) 信息抽取：建议对抽取内容进行结构化与精简处理，提升数据一致性与可复用性，后续可作为从海量文献中构建专业数据库的基础工具使用；

4) 技术动态跟踪：暂无针对性的改进建议。

四、测评结论

综合本次用户测评结果，知识与逻辑增强物质科学科研助手系统整体运行稳定，核心功能模块表现良好，能够在文献理解、实验信息提取及技术趋势分析等典型应用场景中有效支持用户的科研与学习需求。用户普遍认为系统在专业一致性、信息获取效率及功能完成度方面具有较高实用价值，尤其在降低文献阅读成本和提升信息整理效率方面优势较为突出。与此同时，测评也显示系统在知识整合深度、结果精简度及部分功能扩展能力方面仍具进一步优化空间。总体来看，该系统已具备较好的应用基础与推广潜力，可在持续迭代优化的基础上逐步满足更高层次的科研应用需求。

测评方签字： 	**日期：** 2025.12.27